

One of the metal property modification methods is thermochemical treatment. It is metal diffusion saturation with an alloying element. There are the phase transformations according to the binary equilibrium diagram during the alloying element diffusion process.

The most effective technique is the ion-plasma method.

The numerical calculation lets take into account many factors and predict optimal treatment parameters.

The developed mathematical model describes the diffusion at the plasma treatment with phase transformation according to the binary equilibrium diagram.

The calculations show the model gives true modified depth, but the equilibrium diagram for alloying element and complex metal is necessary to simulate more detailed concentration profile.

РАВНОМЕРНО-ПРИГОДНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Зунг Ван Лы (Вьетнам), И.Д. Феранчук

Белорусский государственный университет,

пр. Независимости, 4, 220030, Минск, Беларусь, dvanlu@gmail.com, fer@open.by

В работе исследуется модель взаимодействия частицы со скалярным квантовым полем, которая описывает взаимодействие электронов с акустическими фононами кристалла. В этом случае стандартная теория возмущений приводит к расходящимся выражениям при расчете энергии основного состояния системы. В работе показано, что при корректном выборе вектора состояния системы как энергия основного состояния, так и физическая масса частицы остаются конечными во всем диапазоне изменения константы связи.

Введение

Задачи о взаимодействии частицы с квантовым полем возникают при описании электрон-фононного взаимодействия в твердом теле [1], при рассмотрении движения частиц в поле лазерной волны [2], в нерелятивистской модели квантовой электродинамики [3] и в других проблемах. При использовании стандартной схемы теории возмущений (ТВ) в таких задачах важную роль играет предположение об «адиабатическом выключении взаимодействия» [4], которое позволяет выбирать асимптотические состояния, соответствующие свободной частице и полю, в качестве нулевого приближения ТВ. При этом в большинстве моделей, используемых в квантовой теории, диаграммы стандартной ТВ приводят к бесконечным величинам из-за расходимости интегралов. В то же время существует уникальная физическая модель – «проблема полярона», в которой сходятся интегралы, соответствующие всем диаграммам ТВ, и не возникает необходимости вводить импульсы обрезания и выполнять перенормировку массы с использованием бесконечных величин [5]. Поэтому принципиальный интерес представляет исследование вопроса о том, являются ли расходимости, возникающие в других моделях, реальными особенностями этих систем или следствием некорректного применения ТВ. Анализ этого вопроса и является целью настоящей работы.

Основная часть

Рассмотрим гамильтониан системы, состоящей из нерелятивистской частицы, взаимодействующей с квантовым скалярным полем:

$$\hat{H} = -\frac{\Delta}{2} + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + \sum_k \frac{g}{\sqrt{2\Omega\omega_k}} (e^{i\vec{k}\vec{r}} a_k + e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_k^+), \omega_k = k = |\mathbf{k}|.$$

Здесь выбрана система единиц, в которой масса

свободной частицы $m=1$, $\hbar=c=1$; g – безразмерная константа связи частицы с полем, Ω – нормировочный объем; a_k^+, a_k^- – операторы рождения (уничтожения) квантов поля с импульсом и энергией ω_k . В качестве физической системы, которой соответствует этот модельный гамильтониан, может рассматриваться электрон в поле акустических фононов в рамках непрерывной модели кристалла [1].

Дальнейшие вычисления рассмотрим для основного состояния системы, соответствующего вакуумному состоянию поля

$$|\Psi_{\vec{P},0}^{(0)}\rangle = e^{i\vec{P}\vec{r}} |0\rangle; \quad E^{(0)}(\vec{P},0) = \frac{P^2}{2}; \quad \vec{P} = \vec{p}.$$

Очевидно, что поправка первого порядка к энергии системы равна нулю, а поправка второго порядка связана с однофононными промежуточными состояниями и во втором порядке определяется следующим интегралом:

$$\Sigma(\vec{P}) = E^{(2)}(\vec{P},0) = -\sum_k \frac{g^2}{2\Omega\omega_k} \frac{1}{k^2/2 - \vec{P}\vec{k} + \omega_k}.$$

Для любого значения полного импульса этот интеграл логарифмически расходится при больших k (ультрафиолетовая расходимость). В то же время рассматриваемая модель является перенормируемой. Перенормированное значение массового оператора возникает при вычитании бесконечной энергии системы с нулевым импульсом $\Sigma_R(\vec{P}) = \Sigma(\vec{P}) - \Sigma(0)$ и является конечным.

Это позволяет выполнить перенормировку массы электрона и вычислить его "физическую" массу m^* , рассматривая разложение энергии по импульсу:

$$E^{(0)}(\vec{P},0) + \Sigma_R(\vec{P}) \approx \frac{P^2}{2m^*}.$$

Во втором порядке теории возмущений находим:

$$m^* \approx 1 + \frac{g^2}{12\pi^2}; \quad g \ll 1.$$

Таким образом, в рамках рассматриваемой модели использование ТВ приводит к бесконечной энергии основного состояния системы, если в качестве нулевого приближения рассматривать состояния, соответствующие асимптотически свободной частице и квантовому полю.

Но этот результат не связан с реальными физическими характеристиками системы, а обусловлен неадекватным выбором начального приближения. Выберем вектор состояния, представляющий собой произведение квадратично интегрируемой волновой функции частицы и когерентного состояния поля, аналогичный тому, который используется в теории полярона [5]:

$$|\Psi(\vec{r}, \vec{R})\rangle = \phi(\vec{r} - \vec{R}) \exp\left(\sum_k (u_k^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_k^+ - \frac{1}{2} u_k^2)\right) |0\rangle.$$

Классические фурье-компоненты поля и нормированная волновая функция находятся при минимизации функционала, вычисленного с полным гамильтонианом системы. Здесь \vec{R} - пока произвольная точка, относительно которой локализовано рассматриваемое состояние в пространстве. Вычисляя функционал и соответствующие производные, находим:

$$u_k = -\frac{g}{\sqrt{2\Omega\omega_k^3}} \int d\vec{r} |\phi(\vec{r})|^2 e^{-i\vec{k}\vec{r}};$$

При этом энергия основного состояния системы определяется выражением:

$$E_L^{(0)}(0) = \int d\vec{r} \phi(\vec{r}) \left(-\frac{1}{2} \Delta\right) \phi(\vec{r}) - \sum_k \omega_k u_k^2.$$

При таком выборе пробной функции все выражения уже не содержат ультрафиолетовой расходимости при любых значениях константы связи. В то же время это состояние является вырожденным, поскольку энергия системы не зависит от координаты \vec{R} , где локализована волновая функция частицы. Выбор правильной линейной комбинации таких вырожденных состояний позволяет построить вектор состояния, являющийся собственным и для оператора полного импульса:

$$|\Psi_{\vec{P}}^{(L)}(\vec{r})\rangle = \frac{1}{N_{\vec{P}} \sqrt{\Omega}} \int d\vec{R} \phi(\vec{r} - \vec{R}) \exp\left(i\vec{P}\vec{R} + \sum_k \left(u_k a_k^+ e^{-i\vec{k}\vec{R}} - \frac{1}{2} u_k^2\right)\right) |0\rangle;$$

Нормировочная константа определяется выражением:

$$|N_{\vec{P}}|^2 = \int d\vec{R} \int d\vec{r} \phi_{\vec{P}}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{P}}(\vec{r} + \vec{R}) \exp\left(i\vec{P}\vec{R} + \sum_k |u_k|^2 (e^{-i\vec{k}\vec{R}} - 1)\right)$$

Все величины в приведенных формулах содержат только сходящиеся интегралы, а энергия "одетой" частицы, как функция полного импульса и константы связи, в нулевом приближении определяется средним значением полного Гамильтониана по этому вектору состояния:

$$E_L^{(0)}(\vec{P}, g) = \int d\vec{r} \langle \Psi_{\vec{P}}^{(L)}(\vec{r}) | \hat{H} | \Psi_{\vec{P}}^{(L)}(\vec{r}) \rangle. \quad (1)$$

Сначала вычислим характеристики связанного состояния частицы и поля без учета трансляционной симметрии. Для этого используем масштабные преобразования

$$\vec{r} = \frac{\vec{\rho}}{g^2}; \quad \vec{k} = g^2 \vec{q}; \quad \phi(\vec{r}) = g^3 \chi(\vec{\rho}),$$

которые позволяют определить с точностью до множителя аналитическую зависимость энергии основного состояния от константы связи

$$E_L^{(0)} = \int d\vec{\rho} \frac{g^4}{2} (\vec{\nabla}_{\vec{\rho}} \chi(\vec{\rho}))^2 - \frac{g^4}{4\pi} \int d\vec{\rho} \int d\vec{\rho}' \frac{|\chi(\vec{\rho})|^2 |\chi(\vec{\rho}')|^2}{|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|}.$$

Как и в случае «полярона», этот функционал можно минимизировать с помощью простой пробной функции, зависящей только от одного вариационного параметра λ :

$$\chi_0(\vec{\rho}) = \sqrt{\frac{\lambda^3}{8\pi}} e^{-\lambda \rho / 2},$$

что позволит выполнить основную часть расчетов аналитически.

Минимизация энергии приводит к следующему результату:

$$\lambda = \frac{5}{32\pi}; \quad E_L^{(0)}(0) = -g^4 \frac{25}{2^{13} \pi^2}. \quad (2)$$

Рассмотрим теперь энергию (1) основного состояния системы с учетом трансляционной симметрии

$$E_L^{(0)}(\vec{P}, g) = \frac{P^2}{2} - (\vec{P}\vec{Q}) + \frac{Q^2}{2} + E_f(\vec{P}) + E_{int}(\vec{P});$$

Прежде всего, заметим, что если выбрать волновую функцию локализованного состояния в виде:

$$\phi_{\vec{P}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{P}\vec{r}} \phi_0(\vec{r}),$$

то вектор $\vec{Q} = 0$, а энергия поля E_f и энергия взаимодействия E_{int} не зависят от полного импульса. Это означает, что в рассматриваемом приближении «поступательное» и «внутреннее» движения «физической» частицы разделяются и полная энергия системы принимает следующий вид:

$$E_L^{(0)}(\vec{P}, g) = \frac{P^2}{2} + E_f + E_{int} = \frac{P^2}{2} + E_L^{(0)}(0, g);$$

Теперь суммарную энергию можно минимизировать по λ , что приводит к следующему выражению для энергии, которая уже не зависит от λ :

$$E_L^{(0)}(0, g) = -\frac{g^2 (E_{f1} + E_i)^2}{4E_{f2}} \quad (3)$$

Рассмотрим предельные случаи, соответствующие слабой и сильной связи.

1) При $g \ll 1$ (слабая связь):

суммарная энергия:

$$E_L^{(0)}(0, g) = -\frac{g^2 (E_{f1} + E_i)^2}{4E_{f2}} = -0.0779 g^2. \quad (4)$$

2) При $g \gg 1$ (сильная связь):

суммарная энергия:

$$E_L^{(0)}(0, g) = -\frac{g^2 (E_{f1} + E_i)^2}{4E_{f2}} = -0.0183105 g^2. \quad (5)$$

Заключение

Результаты вычислений по формулам (2) - (5) представлены на рис.1 и 2. Они показывают, что энергия «физической» частицы в поле остается конечной во всем диапазоне изменения констан-

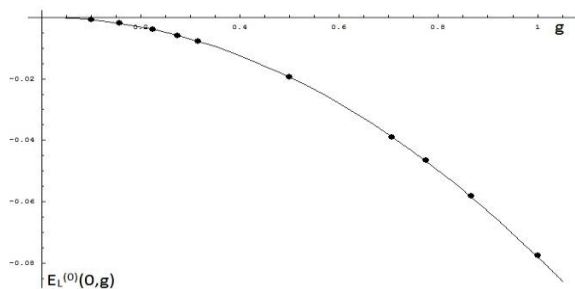


Рис. 1. Зависимость энергии основного состояния от g в случае слабой связи: сплошная линия соответствует аналитической формуле (4); точки – результатам численного расчета интегралов в (3).

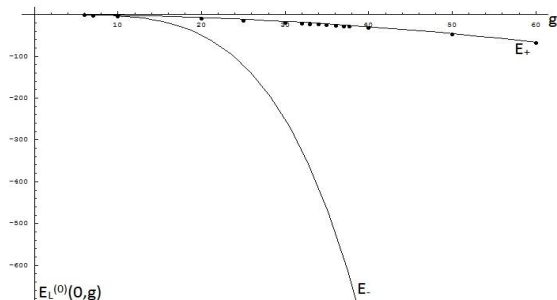


Рис. 2. Энергия связи системы в области сильной связи: E – расчет по формуле (2) без учета трансляционной симметрии; E_+ – расчет по формулам (5) (сплошная линия) и (3) (точки).

ты связи. Следующий этап исследования поставленной проблемы требует вычисления поправок, обусловленных взаимодействием «физической» частицы с квантовым полем. Как было показано ранее в наших работах (см. например, [6]), при построении ТВ, равномерно-пригодной во всем диапазоне константы связи, для расчета последовательных приближений для каждого состояния квантовой системы необходимо использовать различный ортонормированный базис, что приводит к достаточно громоздким вычислениям. Они будут рассмотрены в отдельной работе.

Список литературы

1. Давыдов А.С. Теория твердого тела. Наука, Москва, 1976. 640 с.
2. Di Piazza A., Muller C. Hatsagortsyan K.Z, Keitel C. H. // Extremely high-intensity laser interactions with fundamental quantum systems. // Rev. Mod. Phys. 2012. V. 84. P.1177–1228.
3. Healy W.P. Non-relativistic Quantum Electrodynamics. Academic Press, London, 1982.
4. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в Теорию Квантованных Полей. Наука, Москва, 1973.
5. Mitra T.K., Chatterjee A., Mikhopadhyay S. Polarons. // Phys. Reports. 1987. V. 153. P. 91-178.
6. Иванов А.А., Феранчук И.Д. Квантовая Механика Физических Систем без Малого Параметра. Изд. БНТУ, Минск, 2008. 369 с.

A SUITABLE UNIFORM APPROXIMATION FOR ELECTRON-PHONON INTERACTION

Dung Van Lu, Ilya Feranchuk

Belarussian State University

4 Nezavisimosti Ave., Minsk, 220030, Belarus, dvanlu@gmail.com, fer@open.by

Model for the interaction between particle and scalar quantum field is investigated in the present paper. The conventional perturbation theory leads to the divergent expression for the ground state energy of the system. It is shown in the paper that the both ground state energy and the physical mass of the particle are finite if the zero approximation if the state vector of the system is chosen by adequate way.